Un compendio de programas gratuitos para hacer ciencia adornado con anécdotas, tips y links útiles.

SOFTWARES GRATUITOS PARA CIENTÍFICAS Y CIENTÍFICOS

Un mini-libro de Marcos Bertuola



LICENCIA CREATIVE COMMONS

Usted es libre de:



Copiar, distribuir y comunicar públicamente la obra



Debe reconocer los créditos de la obra de la manera especificada por el autor.



No puede utilizar el material con fines comerciales.



Si altera, transforma o construye sobre el material, no puede distribuir el material modificado.

Bertuola, Marcos

Softwares gratuitos para científicas y científicos

Primera edición: Octubre 2021

57 p.

e-mail: marcos.bertuola@gmail.com

Softwares gratuitos para científicas y científicos © 2021 by Marcos Bertuola is licensed under Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International

Índice

Introducción1	L
Obsolescencia programada2	2
Aplicaciones de oficina (suite de ofimática)	3
Gestor de referencias o gestor de citas6	วิ
Manipulación y generación de figuras	7
Análisis de imágenes12	2
Creando representaciones en 3D	3
Preparando para imprimir en 3D16	วิ
Reconstrucción 3D de imágenes médicas19)
Armando videos21	1
Graficando y analizando datos26	5
-Análisis de picos de espectroscopía de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS)29)
-Análisis de espectros FTIR, ATR-FTIR, RMN, RAMAN y UV-Vis34	1
Análisis estadístico con PAST 437	7
Digitalización de gráficos escaneados o en formato de imagen41	1
Análisis de elementos finitos43	3
Herramientas de análisis, desarrollo y programación44	1
Herramientas en navegadores47	7

Introducción

Con el tiempo me fui dando cuenta de la cantidad de programas pagos con contraseñas compartidas, de origen más que dudoso, que usamos a lo largo de la vida. Desde la educación primaria nos presentan editores de texto e imágenes, sistemas operativos, y otras herramientas pagas que por pertenecer a una institución y ser una edición educativa pensamos que los podemos instalar en nuestra PC hogareña de manera gratuita, y no es así. Todo lo contrario, son caros, en dólares y últimamente los cobran como servicios anuales o incluso hasta mensuales. Lo que nos sucede es que ya nos acostumbramos demasiado a sus funciones, la ubicación de los menús, su interfaz gráfica, tanto que no queremos aprender de nuevo a utilizar otro software aunque sus alternativas sean gratuitas. Sin embargo, personalmente como científico del sistema público argentino creo que debemos intentar migrar hacia el software gratuito que últimamente se están volviendo más amigables con el usuario, y dejar los pagos para las empresas que puedan costearlo. Inclusive podríamos donar a los desarrolladores de dichos programas lo que queramos con el fin de apoyar la iniciativa que mantienen.

Pero, ¿por qué me parece más productivo para el sistema científico trabajar con software gratuito? Me pasó que compañeros/as de laboratorio me enviaran un archivo de edición de imágenes en un formato exclusivo de un editor de imágenes comercial que yo no tenía instalado, o un archivo de datos y gráficos elaborado en un programa pago que no podía abrirlo en mi PC. Para poder acceder a los datos y colaborar con el análisis de datos y de imágenes debía instalarme los programas específicos, conseguir que alguien me prestara una clave del instituto y rogar para que funcionara en mi computadora. Es obvio que no siempre se lograba y debía usar la PC del instituto en la que se habían generado esos archivos, cuando estuviera desocupada. Era muy engorroso y costaba tiempo. Si los científicos y científicas usáramos programas gratuitos y/o libres podríamos tener cada uno el mismo programa en nuestra PC, no habría incompatibilidades de archivos y en tiempos

de pandemia podríamos colaborar más y más rápido entre la comunidad. Además, muchas de las alternativas gratuitas de las que hablo en éste mini libro son programas livianos que se pueden usar en casi cualquier PC, eliminando la necesidad de comprar nuevo hardware y desechar computadoras consideradas de mala manera obsoletas.

El objetivo de éste corto libro es introducirlos a las herramientas productivas gratuitas, la mayoría multiplataforma, para el mundo científico e incentivarlos a utilizarlas, compartiendo anécdotas, tips y ejemplos de uso. Espero que lo disfruten.

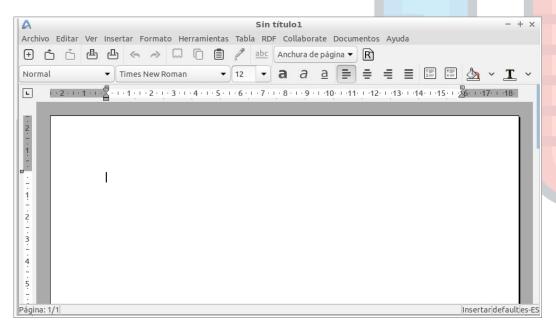
Obsolescencia programada

Al momento de escribir este texto estoy utilizando LibreOffice Writer, un software libre de edición de texto que nada tiene que envidiarle al que nos enseñaron desde chicos. El programa posee todas las características y funciones de su principal competidor comercial, sin embargo la gente se vuelca de lleno a la opción que más conoce, aunque sea paga y de suscripción mensual. Hasta algunos llegan a "piratearlo" por su elevado costo sólo por la comodidad de usar un programa ya aprendido. Otros, científicos como yo, dudan en pasarse a alternativas gratis por no tener compatibilidad con gestores de citas reconocidos muy útiles a la hora de escribir artículos científicos. Mi conversión al mundo del software libre multiplataforma (programas que "corren" en varios sistemas operativos, principalmente Windows® y Linux en mi caso) comenzó durante la pandemia del 2020. Al verme encerrado en mi domicilio con mi notebook hogareña de diez años de antigüedad, la cual utilizaba para ver películas y series y para navegar por internet, tuve que migrar de Windows® 10 a Linux por una incompatibilidad de la tarjeta de WiFi con un protocolo de internet del cual no tenía idea. Antes de ese cambio radical probé solucionar la intermitencia de señal WiFi cambiando la placa, reinstalando Windows® 10 (instalación limpia), cambiando la frecuencia de la señal a 5GHz, pero nada funcionó. Lo

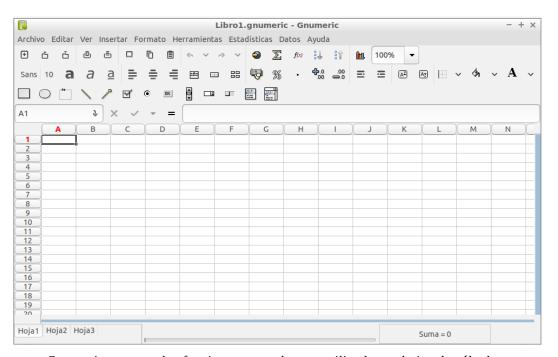
único que quedaba era comprarme otra computadora, pero ¿por qué debía seguir los mandatos de la obsolescencia programada?. Por lo tanto, comencé a averiguar qué distribución de Linux era recomendable para mi computadora. Probé miles. Hasta que finalmente me quedé con Lubuntu 18.04. Este sistema operativo, diseñado para PC's de bajos recursos (al menos 512MB de RAM y un procesador Pentium 4) satisfacía todas mis necesidades: reconocía el hardware, tenía señal normal de WiFi, le podía instalar programas sencillamente por ser una distribución basada en Debian (utilizando la tienda de aplicaciones o con el comando *sudo apt-get install* desde la terminal), era muy intuitivo y rápido. No sé por qué hablo en pasado si es el sistema que uso actualmente. Como se imaginarán, ya no podía utilizar la suite de ofimática de Windows® lo cual era un pena ya que mi universidad me otorgó una licencia gratuita. A continuación les cuento como sobrepasé este pequeño inconveniente y otros que me surgieron a medida que trabajaba con ésta computadora para el laboratorio de investigación del cual formo parte.

Aplicaciones de oficina (suite de ofimática)

El sistema operativo Lubuntu viene con una versión de editor de texto y hojas de cálculo similares a las ya conocidas, aunque muchísimo más livianas (Abiword y Gnumeric, respectivamente) y que para el común de los usuarios son súper útiles. Podés trabajar con los formatos de archivos conocidos y varios más específicos de software libre, habiendo instalado previamente las fuentes de caracteres restrictivos con el comando *sudo add-apt-repository multiverse* \rightarrow *sudo apt update* && *sudo apt install ttf-mscorefonts-installer*. Ambos programas tienen muchas de las funciones más utilizadas en editores de texto y gestores de hojas de cálculo, hasta me impresionó que en Gnumeric podías ingresar fórmulas en las celdas, filtrar datos, analizarlos estadísticamente, etc.



Interfaz gráfica del Abiword, pueden observar similitudes con el software comercial más conocido.



Gnumeric presenta las funciones normalmente utilizadas en hojas de cálculo.

Las hojas de cálculo no las uso normalmente para analizar mis datos, salvo para calcular promedios, errores estándar y tener una vista rápida de mis datos en un gráfico de barras, ya veremos una mejor alternativa más adelante. A pesar de ello, yo sabía que faltaba algo en Abiword, y eso era el plugin del gestor de citas.

En ese momento decidí descargarme la suite de <u>LibreOffice</u> ya que era más completa y prometedora, trae un software para crear presentaciones .ppt, hojas de cálculo, texto, editor de fórmulas, base de datos, y hasta una aplicación dedicada a generar dibujos. En el editor de textos se puede instalar el plugin del gestor de citas gratuito Mendeley® tal como se procede en el procesador de textos comercial. Exactamente igual. Recuerdo viejos tiempos, cuando recién estaba comenzando mi doctorado que los científicos utilizaban ese famoso EndNote®, que era muy tedioso y además había que conseguir la clave por vías oscuras. Me decían que usaban ese programa porque uno podía exportar la librería de una computadora e importarla a otra. Lo intenté hacer una vez y no me funcionó. En ese momento me enteré del Mendeley® que iba de boca en boca, era gratuito, podías sincronizarlo con una cuenta también gratuita en la web para tener tus referencias y hasta los documentos donde quisieras y, lo más importante en mi opinión, podías buscar textos dentro de los papers que subías a la plataforma.



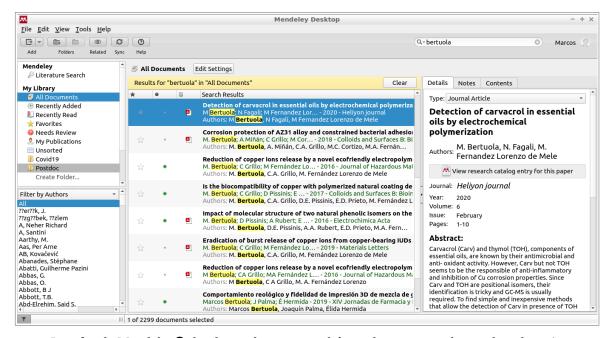
Vista de la barra de tareas de LibreOffice Writer con el plugin del gestor de referencias Mendeley® instalado.

Es importante destacar que la suite de LibreOffice es compatible tanto con Linux como con Windows®. Y si no tenés una cuenta de mail de alguna universidad o instituto educativo con la cual acceder a la suite comercial de manera gratuita, sugiero que al

menos intentes un mes con el LibreOffice. No vas a perder nada, podés seguir trabajando tus archivos .doc .docx .xls .xlsx .ppt y .pptx tranquilamente.

Gestor de referencias o gestor de citas

Como ya mencioné, Mendeley® es por mucho la mejor opción para insertar citas en un documento. Al descargarlo tendrás que crearte una cuenta, es un trámite rápido. Con esta cuenta tendrás tus documentos sincronizados en la nube. Lo interesante del software es la posibilidad de armar tu biblioteca de papers y libros, organizadas en carpetas o no, y realizar búsquedas dentro de todos los documentos de palabras o frases que en algún momento leíste y ya no te acordás en que paper estaban. También podes buscar por autor o grupos de autores, por eso a mi me gusta (y me re sirve) cargar los documentos en una sola carpeta y así buscar dentro de todos ellos (ver carpeta "All Documents" en My Library, siguiente figura).



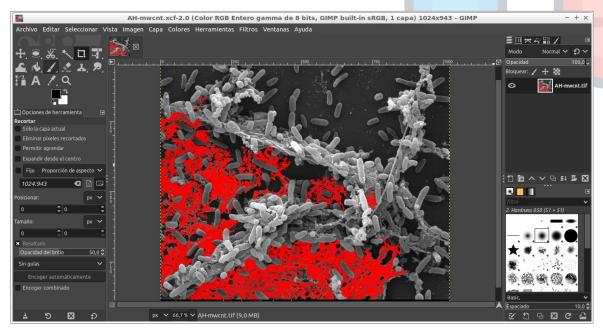
Interfaz de Mendeley® donde puede verse una búsqueda por autor dentro de todos mis documentos, y un detalle de uno de los documentos a la derecha.

Adicionalmente uno puede abrir los archivos .pdf en pestañas dentro del programa, resaltar texto, agregar notas y todo queda cómodamente guardado. También podes abrirlos desde el listado de documentos con el lector de PDF de tu computadora y abrir la carpeta contenedora si querés copiarlo o llevarlo a otro directorio. Como Mendeley® se volvió muy popular entre las editoriales de revistas científicas, la mayoría de los journals adjuntan su estilo de citas requerido para publicar en su página web. Sino uno mismo puede buscarlo desde *View* → *Citation Style* → *More Styles* → *Get More Styles* e ingresando el nombre de la revista. Otra opción interesante que tiene este programa es, como ya expliqué antes, que si ustedes quieren, por ejemplo, tener la bibliografía en la computadora del trabajo y en su computadora personal, simplemente se descargan el Mendeley® e inician sesión con su cuenta. Así van a tenerla sincronizada y lo primero que les aparecerá será el listado de los documentos. Para tenerlos físicamente en la nueva computadora tendrán que darle doble click y se descargarán en una carpeta predefinida.

Manipulación y generación de figuras

Un capítulo aparte ocupan los programas de edición de imágenes. Siempre me costó conseguir un buen programa de edición de imágenes que me corriera en mi computadora. Últimamente, antes de éste cambio radical, venía usando el Adobe Photoshop® y el Corel Draw® cuando tenía que componer una figura a partir de gráficos e imágenes de microscopía, o para un *graphical abstract*. Lo malo de estos programas era que si tenía que realizarle algunos cambios a las figuras, si o sí tenía que volver a una PC con el mismo programa instalado para poder abrir los archivos. Por eso opté por buscar alternativas gratuitas y encontré (tarde, porque ya mucha gente lo había encontrado antes) el GNU Image Manipulation Program o GIMP y el Inkscape. El GIMP sería el reemplazo del Photoshop®, trabaja con mapa de bits y sirve para realzar colores, ajustar el brillo y

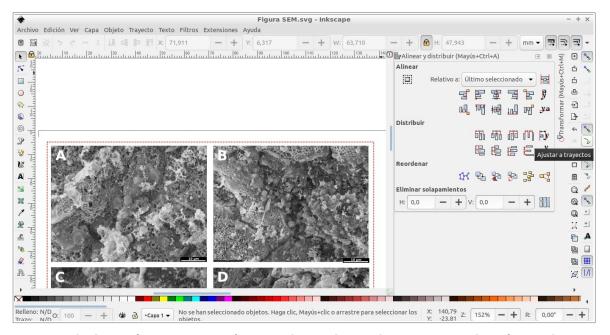
contraste de una imagen, aplicarle filtros y máscaras, entre muchas de otras fascinantes funciones.



Utilizando GIMP para generar una máscara de color sobre la matríz de exopolisacáridos secretada en un biofilm bacteriano, a ser cuantificada en otro software (ImageJ).

Por otro lado, el Inkscape es muy útil para agregarle recuadros a cada imagen y así generar figuras compuestas, para agregarle flechas y otras formas (lo uso mucho para cambiarle el grosor a la escala de las fotos de microscopía y aumentar el tamaño de la fuente), permite también agregarle letras a las secciones de la figura (como cuando tenés más de una imagen dentro, tipo A, B, C) y alinear todos los objetos dentro de una manera fácil y rápida. El Inkscape, al trabajar con vectores no pierde la calidad de la imagen al redimensionarla, por eso es que lo utilizo mucho más que el GIMP para generar las figuras compuestas. Ambos programas tienen la posibilidad de guardar sus proyectos y abrirlos más tarde para modificarlos sin tener que empezar de nuevo, y también podés exportarlos

como imagen con la resolución recomendada para las revistas científicas (normalmente 300 dpi). Estos archivos que contienen los proyectos pueden compartirlos con otros usuarios, que pueden instalarse éstos programas gratuitos y así trabajar colaborativamente sin tener que exportar la imagen, perdiendo calidad, para que otros u otras colaboradores/as puedan abrirla en otra PC a falta de clave del software comercial.



Ejemplo de una figura para un póster siendo creada en Inkscape a partir de imágenes de microscopía electrónica de barrido.

Se van a encontrar con que el Inkscape no les permite exportar la imagen en otro formato que no sea .png, y que al abrirla con un visor de imágenes cualquiera, el fondo de la misma es transparente. Lo que tienen que hacer es cambiar el color del fondo o de la hoja a blanco, o agregar un recuadro blanco en el fondo y exportarlo así. Una vez generado el archivo .png lo abren con el GIMP y lo guardan como .tiff o .jpeg manteniendo la calidad de la figura original y listo. Es un paso extra, sí, pero ésto lo hago una vez que ya tengo la

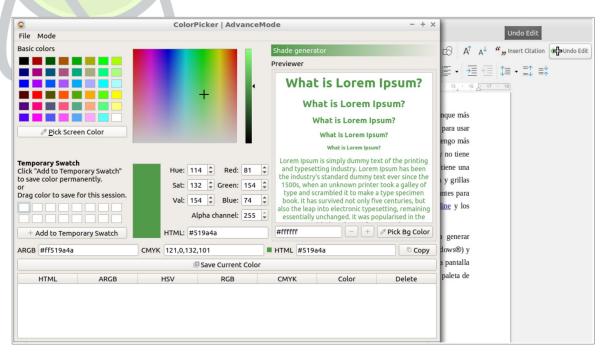
imagen final como quiero (y como quieren los/as coautores/as del trabajo) y en cualquier PC donde tenga instalado el programa ya que es gratis. Cabe aclarar que ambos programas funcionan muy bien y rápido en computadoras de bajos recursos, como la mía, y en internet encontrarán muchos video-tutoriales y tutoriales en inglés y en castellano *for free*.

El GIMP y el Inkscape me salvaron la vida cuando yo cursaba mi doctorado en la ciudad de La Plata viviendo en Lomas de Zamora, y se cortaba el servicio de trenes eléctricos obligándome a trabajar desde casa y con mi notebook. Mi carpeta personal de la compu del laboratorio estaba sincronizada con la nube, asique descargaba los archivos de los proyectos que estaba realizando, los seguía modificando en mi casa y los volvía a subir a la nube. Algo similar ocurre ahora en la pandemia, mis archivos de la beca postdoctoral están sincronizados vía Google Sync y durante la cuarentena pude trabajar tranquilamente con mis proyectos de figuras para pósters y papers.

Recientemente encontré a <u>Krita</u>, que opera con mapas de bits como el GIMP, aunque más potente y completo. Krita contiene una paleta de pinceles muy amplia, excelente para usar con una tableta gráfica. Todavía no lo utilicé para trabajos científicos porque no tengo más imágenes para manipular, pero lo estuve probando para dibujar a mano alzada y no tiene nada que envidiarle a los programas pagos. Lo impresionante de Krita es que tiene una función que yo andaba buscando que es la generación de puntos de perspectiva y grillas para facilitar el dibujo en tres dimensiones. Además, suma varios filtros interesantes para ilustraciones bien profesionales. Les sugiero para comenzar leer el <u>manual online</u> y los tutoriales de <u>David Leroy</u>.

Continuando con la edición de figuras para pósters o papers, algunas veces necesitamos un identificador de color, como el gotero, para generar imágenes o colages de imágenes. Para esa tarea tenemos a <u>Colormania</u> (para Windows®) y a <u>Color Picker</u> (para Linux) que nos permiten usar el selector de color en toda la pantalla de tu PC, y luego pegar los códigos

numéricos correspondientes al mismo en la paleta de color del software de dibujo en el que estemos creando la imagen.

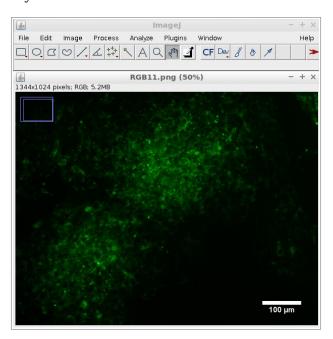


Ejemplo de uso de Color Picker seleccionando el color verde del ícono de Libreoffice "Undo Edit". Se observan los códigos de colores que corresponden al verde seleccionado, listos para copiar y pegar en cualquier otro programa.

Quiero añadir acá unos programitas pequeños pero simples que yo utilizo para recortar y/o cambiar el formato de las imágenes rápidamente como alternativa a las herramientas ya mencionadas en las cuales puede ser bastante engorrosa la tarea. Uno de ellos es el <u>Irfanview</u>, que además es un visor de imágenes súper veloz y liviano para Windows® que lo pueden correr en Linux bajo Wine. El otro se llama <u>Gwenview</u>, que no es tan rápido como el Irfanview pero realiza las mismas tareas y es multiplataforma.

Análisis de imágenes

En cuanto a software para análisis de imágenes personalmente siento que estamos más restringidos. Sin embargo, el programa por excelencia y super-reconocido mundialmente, ImageJ, tiene tantas funciones que prácticamente es lo único que necesitamos. Podemos realizar medidas de longitud, áreas, contornos, contar cuerpos (células, bacterias, partículas, etc.), intensidad de fluorescencia, y otras determinaciones simples, con la configuración por *default* del ImageJ. El software viene con una enorme batería de herramientas para análisis, pero si quieren alguna función específica o automatizar el proceso, tienen la posibilidad de instalarle *plugins* o *macros*, incluso hasta fabricarlos ustedes mismo a su gusto. Si quieren la versión más completa del ImageJ, con muchos más *macros* y *plugins*, se pueden descargar el FIJI, también gratis. Ambos programas tienen una amplia comunidad detrás, con muchas ganas de ayudar armando *macros* a pedido y *ad honorem*, sugiriendo otras funciones o procedimientos de análisis que hacen a un uso realmente muy ameno.



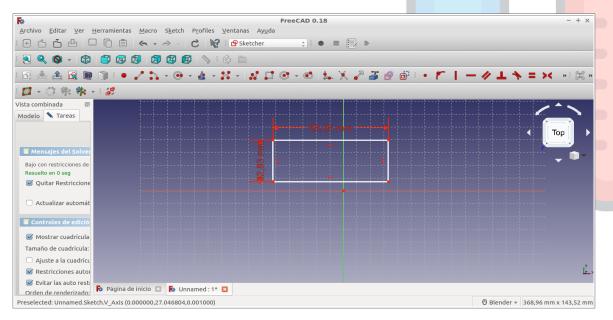
Agregando la barra de escala a una foto de microscopía de fluorescencia con el ImageJ.

Con el ImageJ pude analizar el porcentaje de área cubierta por células sobre biomateriales a partir de fotos de microscopía de fluorescencia (previa tinción de las células con naranja de acridina) durante mi doctorado y así estimar la biocompatibilidad de las modificaciones superficiales que les había aplicado a materiales metálicos implantables. Resumiendo el procedimiento: se aplica un umbral a las fotos de forma manual, se transforma a blanco y negro, se mide el área de las células (en blanco) y se divide por el área total de la foto, obteniendo así el porcentaje de área ocupado por las células adheridas en la superficie de las muestras.

Creando representaciones en 3D

Muchos ya escucharon hablar de los programas CAD o diseño asistido por ordenador, utilizados para generar figuras, maquetas, planos, dibujo técnico, representaciones de maquinarias en tres dimensiones. Las opciones pagas siempre fueron un calvario para utilizarlas en computadoras con poca o media capacidad de procesamiento, necesitan mucha memoria de almacenamiento (5 a 8GB recomendados) y una placa de video -o tarjeta gráfica- potente. Existe una opción multiplataforma de modelado 3D paramétrico llamada FreeCAD muy completa, en permanente actualización y que pesa sólo 774MB instalado (chequeado en Linux). Tiene muchas aplicaciones desde diseño industrial, arquitectura, simulación de fluidos, creación de objetos para impresión 3D (ej. .STL), modificación de mallados, etc.

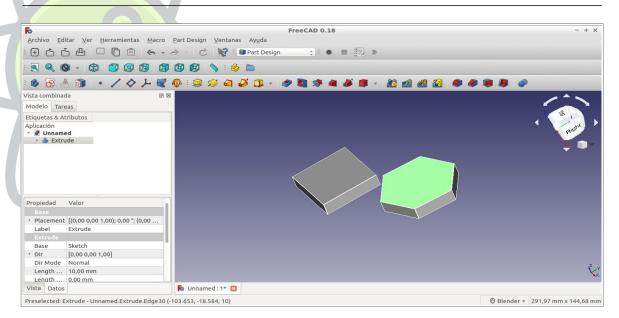
MARCOS BERTUOLA



Creando un simple croquis en FreeCAD para después extruirlo en 3D.

La versión 0.18 es la que uso en la notebook más vieja, con 256MB de memoria de video, y funciona de 10. Está claro que no le saco todo el jugo a éste programa, sólo lo uso para crear objetos en 3D simples (cubos, cilindros, pirámides) para mi investigación en bioimpresión 3D. En Youtube encuentran <u>muchísimos tutoriales</u> de todo lo que se puede <u>hacer con FreeCAD</u> (les dejo los links a videos de Juan Gonzalez Gomez), es una super herramienta y es gratuita.

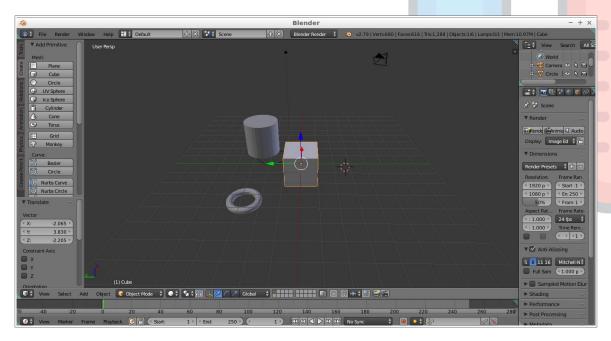
SOFTWARES GRATUITOS PARA CIENTÍFICAS Y CIENTÍFICOS



Figuras tridimensionales simples creadas en FreeCAD.

Otro software algo similar, aunque de modelado no paramétrico, gratuito y muy potente es el <u>Blender</u>. Presenta más opciones para el mallado, texturas, superficies, iluminación, para esculpir y renderizar animaciones 3D. Es especial para diseñadores gráficos y escultores, pero yo lo uso para generar modelos simples en 3D. Es liviano (183MB el.exe), aunque las versiones nuevas necesitan más memoria de video. En su <u>página web</u> pueden descargar versiones anteriores compatibles con PC sin placa gráfica dedicada. Por ejemplo en mi notebook vieja uso la versión 2.79b sin ningún problema. Probando con otra PC Linux y una placa de video de 1.5 GB, la versión 2.92 corre bien suave. Acá les dejo un tutorial completísimo de Blender realizado por Aura Prods: <u>www.youtube.com/watch? v=h4hZzPCOMKs</u>.

MARCOS BERTUOLA

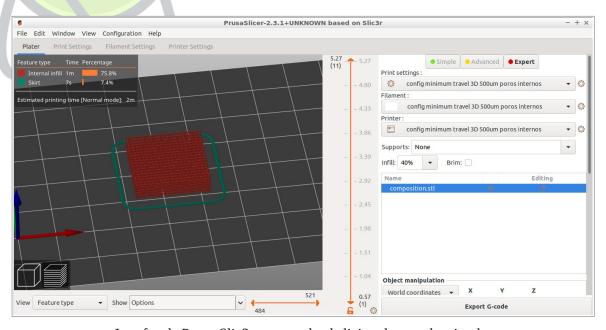


Figuras tridimensionales pre-seteadas de Blender.

Preparando para imprimir en 3D

Los programas que voy a nombrar a continuación son útiles para los que manejan impresoras 3D tanto como un hobby como en investigación. Para poder imprimir los modelos tridimensionales exportados del FreeCAD o Blender (archivos .STL o .OBJ), tenemos que transformarlos a un archivo de formato GCODE (proceso denominado "slicing") que pueda ser leído por una impresora 3D, es decir, trayectorias de filamentos en XYZ. Estos archivos llevan la información del porcentaje y patrón del relleno del objeto, alturas de capa, material de soporte (si es necesario), temperaturas de la cama de impresión y del extrusor del filamento, etc. Para los que no están familiarizados con los softwares de slicing existen al menos tres gratuitos y muy buenos: Prusa-Slic3r, Ultimaker Cura y Repetier Host. Los dos primeros los utilizo para seleccionar los parámetros de impresión que ya nombré, mientras que el Repetier Host lo empleo para observar punto a

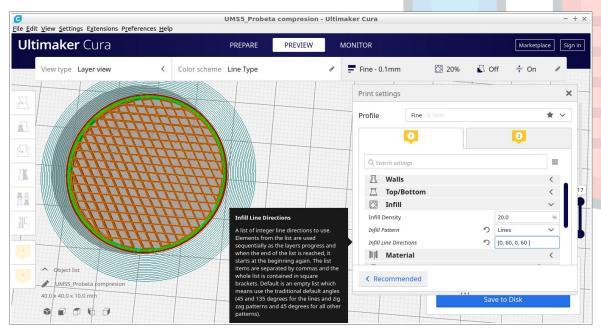
punto el GCODE generado e ingresarle pequeñas modificaciones al trayecto del filamento ya que se marca visualmente a que punto corresponde cada coordenada.



Interfaz de Prusa-Slic3r mostrando el slicing de un cubo simple.

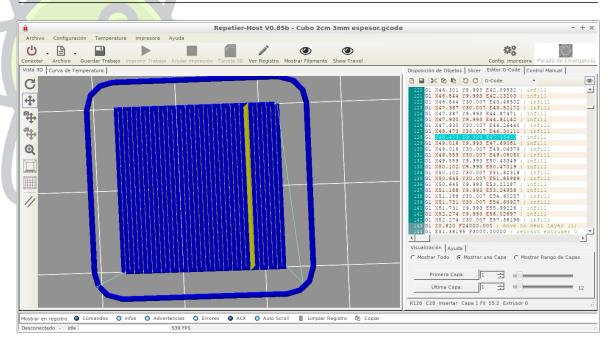
Un punto a remarcar es la posibilidad de variar el ángulo de orientación XY entre capas que nos otorga el Ultimaker Cura. Esta funcionalidad la estuve buscando muchísimo en distintos softwares, incluso pagos, para poder customizar mis bioimpresos 3D porque se supone que ciertas células que se siembran dentro de estos objetos prefieren un ángulo de 60° entre capas.

MARCOS BERTUOLA



Setup del Ultimaker Cura donde podemos ver la opción "Infill Line Directions" con la cual se varían los ángulos entre capas de relleno.

Además, tanto el Ultimaker Cura como el Repetier Host te permiten controlar tu impresora 3D desde la PC. El Repetier Host, a diferencia de los programas anteriores, utiliza el motor de slicing del Slic3r ya que no posee uno propio. Si uno tiene que modificar manualmente el trayecto que genera automáticamente cualquiera de éstos programas, en la pestaña "Editar G-Code" al posicionarse sobre un renglón del código -que representa la posición en X e Y que se va a trasladar el extrusor con respecto a la posición del renglón anterior- se resalta en la representación tridimensional del GCODE la porción del trayecto correspondiente con color amarillo.

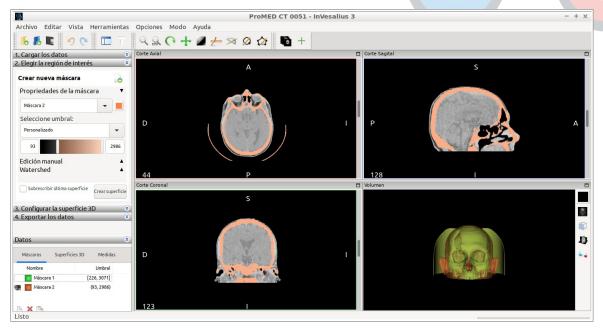


Identificación de una porción del trayecto del GCODE en Repetier Host. El comando resaltado en celeste a la derecha corresponde al trayecto que colorea el software en amarillo (izquierda).

Reconstrucción 3D de imágenes médicas

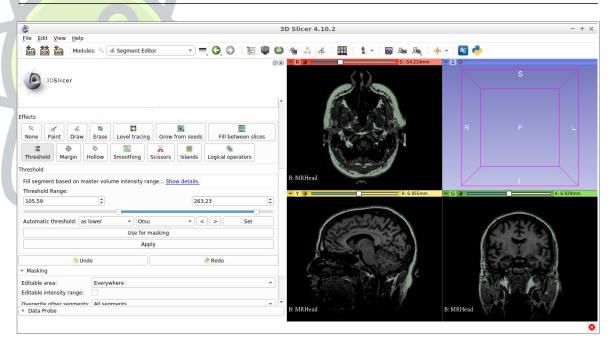
El avance de la impresión y bioimpresión 3D permitió el surgimiento de nuevas líneas de investigación aplicada a la medicina: la bioimpresión de tejidos implantables -como implantes óseos, de cartílago, de piel, etc.- y la impresión 3D de biomodelos. En ambos casos se deben reconstruir, en tres dimensiones, imágenes médicas -tomografías computadas, resonancias magnéticas- con el fin de imprimir reproducciones de tejidos a implantar y modelos anatómicos con precisión. Para ello existen dos alternativas que usé vagamente sólo para estimar la calidad de la reconstrucción obtenida: Invesalius y Slicer 3D. El primero fue diseñado para investigación por el Centro de Tecnología de la Información Renato Archer y la Universidad de Campiñas, Brasil. El Slicer 3D fue desarrollado por o con el apoyo de la National Alliance for Medical Image Computing, del National Institutes of Health (NIH), Estados Unidos. Con estas herramientas podemos

trabajar archivos .DICOM (formatos de salida directos de tomografías y resonancias) y seleccionar con un umbral, de forma manual, los tipos de tejidos que nos interesen para imprimir según la luminosidad de cada tejido (el tejido óseo, más denso, tiene mayor intensidad), proceso al cual se lo denomina segmentación.



Interfaz del Invesalius ejemplificando una selección manual del tejido óseo de una cabeza humana (archivo de muestra del software).

SOFTWARES GRATUITOS PARA CIENTÍFICAS Y CIENTÍFICOS



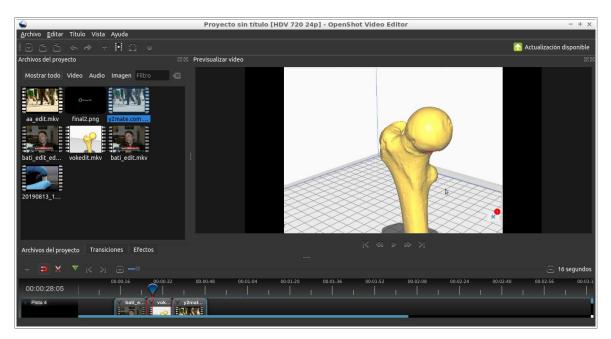
Interfaz del Slicer 3D ejemplificando una selección manual del tejido óseo.

Una vez que se selecciona en color el tejido de interés, y continuando con un posprocesamiento de la imagen (dentro del mismo programa), se exporta el objeto como .STL listo para imprimir. No me voy a detener en todo el proceso -aunque quizás debería- ya que existen tutoriales completos dentro de cada programa.

Armando videos

Si querés editar un video para una clase, un congreso, o para algún otro proyecto que tengas, te dejo por acá un par de programas gratuitos. Yo me topé con ellos cuando tuve que preparar un video de ejercicio para promocionar una idea de proyecto biotecnológico para un curso de posgrado. Conocía muy por arriba el MovieMaker® aunque nunca lo había usado seriamente, pero cuando fui a una PC con Windows® me dí cuenta que ya es pago y que la opción "free" no te permite ir guardando el proyecto. Por lo tanto, y como siempre busco programas multiplataforma, investigué un poco y encontré el <u>OpenShot</u>

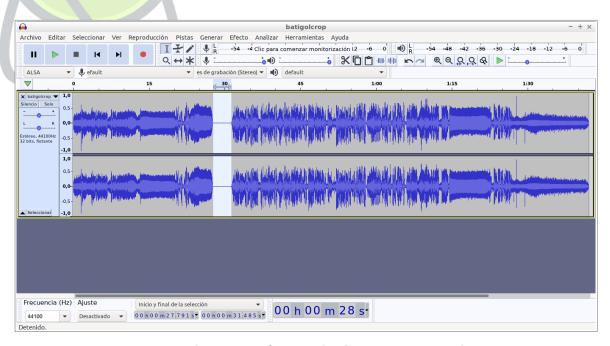
<u>Video Editor</u>. Es simple de usar, liviano (86Mb), podes añadir varias pistas de audio y de video, agregar transiciones y efectos de entrada y salida, imágenes, disminuir o aumentar el volumen en los extremos de la pista, entre otras muchas funciones. Los proyectos se pueden guardar así no se pierden los recortes de videos agregados, las pistas de audio, el orden, etc. Un golazo. Los videos se exportan en diversos formatos: .avi, .mov, .mp4, .mpeg, .oog, .webm y .flv, con algunos codecs cada uno.



Ejemplo del armado de un video en OpenShot Video Editor. Se muestra la vista previa en grande y el orden de los recortes de videos en la pista, abajo.

Ahora bien, ¿que pasa si tenemos un audio grabado que queremos agregar al video pero tiene el volumen muy bajo? Bueno, eso yo lo corrijo con el <u>Audacity</u>. Éste también es un programa liviano (~30Mb), muy útil para recortar audios, ampliar o reducir volumen, acelerar o desacelerar la pista, reducir ruidos, y agregar efectos, entre muchas otras cosas.

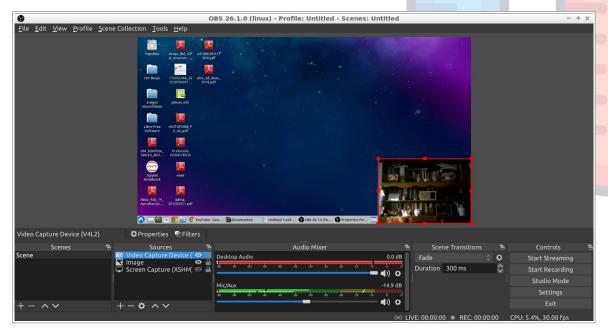
Una vez modificada la pista, se exporta el archivo en los siguientes formatos: .flac, .mp3, .wav o .ogg.



Recortando una sección sin audio de una pista con Audacity.

Una interesante idea, para una clase virtual por ejemplo, es mostrarse a uno/a mismo/a mientras se quiere mostrar alguna tarea o tutorial en la PC, lo que está de moda en Youtube. Para ésto tenemos al <u>OBS Studio</u>, con el cual podes seleccionar que ventanas mostrar y en que posición. Podes mostrarte a vos hablando en un recuadro abajo a la derecha, con un fondo de una presentación de diapositivas o algún video que podes ir alternando en vivo.

MARCOS BERTUOLA



Capturando mi escritorio y mi webcam (recuadro rojo) con OBS Studio.

Otro programa algo similar es el <u>Vokoscreen</u>, que a diferencia del OBS Studio, no captura la cámara web. Yo lo uso para registrar eventos en pantalla, como mostrar el flujo de trabajo en algún programa, unas diapositivas animadas, o alguna actividad interesante para mostrar en un video, y hasta para grabar reuniones o webinars a los que asisto para que no se me pierda ningún detalle. Es un programa de 50MB, y la única advertencia que voy a darles es que tengan cuidado con la duración de las capturas en video ya que los archivos aumentan su tamaño (1 minuto de video equivale a 1,6MB de archivo).

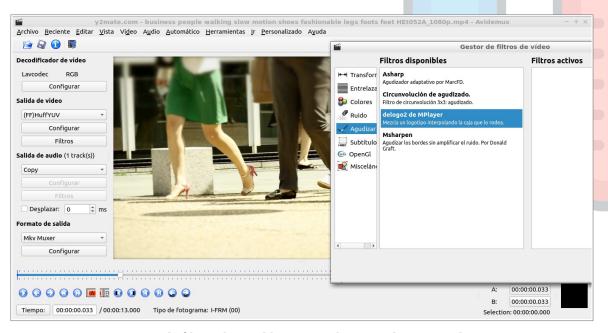
SOFTWARES GRATUITOS PARA CIENTÍFICAS Y CIENTÍFICOS



Interfaz de Vokoscreen preparado para capturar eventos de pantalla.

Un herramienta adicional para ésta sección es <u>Avidemux</u>, otro editor de videos pero que lo destaco por su capacidad de convertir archivos de video a distintos formatos y codecs y por su sencillez para el recorte y la extracción de audios. Con un simple click en audio → guardar audio, ya tenés la pista en .mp3. También podes distorcionar o hacer borrosa alguna parte del video, como para sacarle una marca, para eso se agrega un filtro llamado "delogo2 de Mplayer" dentro del menú video → filtros. Tiene opciones raras, como voltear todo el video para una dirección, recortar el área del video que se quiere mostrar, añadir imágenes sobre el video, y más.

MARCOS BERTUOLA



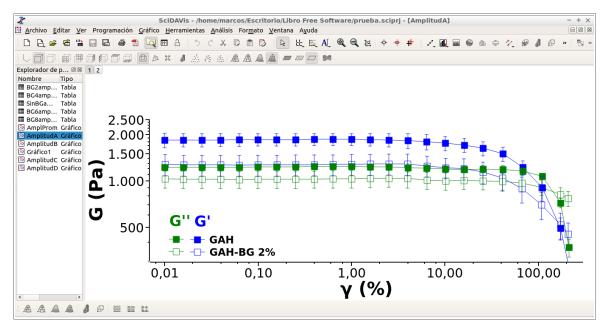
Opciones de filtros disponibles para aplicar a videos en Avidemux.

Por último para ésta sección, hace un tiempo me enteré de una suite de edición profesional de videos llamada <u>Davinci Resolve</u>. Aunque es completísima, me resultó muy pesada (más de 2GB) y lenta para computadoras viejas como la que estoy usando. Pero pueden chequearla y comprobarla ustedes si tienen memoria RAM y una placa gráfica buena. No tengo una captura de pantalla porque a mi se me cuelga la compu, pero sugiero que vayan a su página web.

Graficando y analizando datos

Uno de los softwares de los que más me costó despegarme es el OriginLab®. Lo usé en toda mi tesis doctoral para graficar espectros de FTIR, UV, datos en general (para gráficos de barra), modelado de datos y más. Durante mi doctorado, como cambié de computadora no pude utilizar la clave del producto del otro laboratorio, así que tuve que buscar otro soft

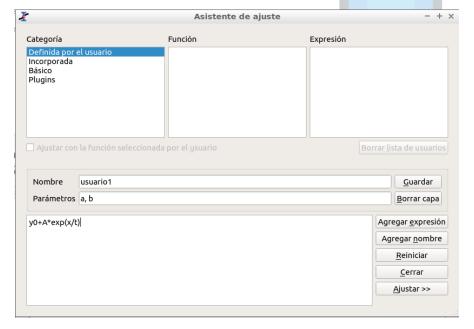
que haga todo o casi todo lo mismo. Encontré el <u>SciDAVis</u>, que por suerte también es multiplataforma y pesa poco más de 10MB. Con SciDAVis podés armar varias hojas de datos o *worksheet*, promediar columnas y filas de datos, sacar estadísticos, transformadas de Fourier, graficar con muchos estilos 2D y 3D, estaqueados de a 2 o de a 4, etc. Los datos se pueden importar desde formatos ASCII, o directamente copiar y pegarlos en las hojas.



Ejemplo de un gráfico para un paper en proceso de creación en SciDAVis.

Una vez obtenido los gráficos podés derivarlos, integrarlos y suavizarlos, y para mí lo más interesante podes realizar ajustes lineales, polinomiales, gausianos, lorenzianos, exponenciales, y hasta con funciones definidas por el usuario.

MARCOS BERTUOLA



Recuadro para agregar una función definida por el usuario para ajustar curvas en SciDAVis.

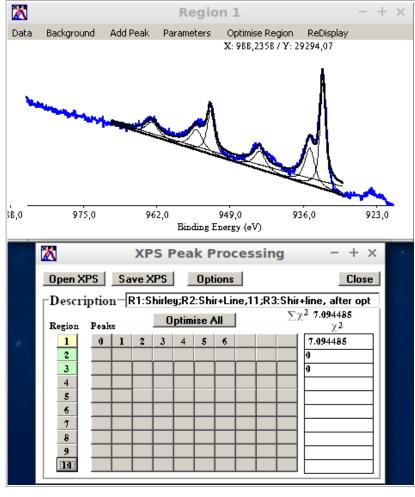
Los gráficos se pueden *customizar* a gusto del usuario, agregando cuadros de texto para indicar el valor de algún pico, líneas de corte punteadas mostrando un umbral, flechas, imágenes importadas, insets con otro gráfico, etc. Así lográs imágenes bien completas para tus posters y papers. También sirve para tener organizados tus espectros o serie datos en *worksheets* dentro de un mismo proyecto, por ejemplo, repeticiones de un mismo ensayo en hojas distintas con sus fechas y nombres, y/o varias condiciones experimentales. Hay que tener en cuenta que si cargás, como yo, una bocha de datos en hojas separadas y los graficás todos en el mismo proyecto, el archivo se vuelve inestable y no lo podes abrir más. Así que les recomiendo que no se excedan o si quieren saber cual es el límite, vayan guardando versiones para poder recuperar los datos después.

Como en toda rama de la ciencia, muchas veces necesitamos programas muy específicos para analizar nuestros datos, análisis que en softwares de propósito general no podemos realizar o nos resulta muy complicado. Por eso a continuación resumo un par que me ayudaron en mi doctorado. Claro que hay muchísimos más, particularmente en el área de

biología molecular -como los que ayudan a diseñar plásmidos, a alinear secuencias de ADN, etc.- que no voy a citar en éste libro porque no usé estas herramientas y me alejé hace mucho de la biología molecular y la genética. Ahora, vamos con algunos ejemplos.

-Análisis de picos de espectroscopía de fotoelectrones emitidos por rayos *X* (*XPS*)

La espectroscopía XPS permite la determinación semicuantitativa de la composición elemental de la superficie de un material mediante la fotoionización por rayos X y el análisis de la dispersión de energía de los fotoelectrones emitidos. Como todo equipamiento científico, los espectrómetros de XPS traen su propio software para adquirir y analizar los datos recabados. Sin embargo, además de ser costosos, normalmente estos programas sólo pueden ser instalados en una única PC, por lo que el análisis de los datos obtenidos sólo se puede realizar en esa misma computadora y por el/la técnico/a del equipo cuando esté disponible. Frente a esta situación, existe un software dedicado al análisis de los espectros de XPS gratuito y extremadamente liviano (528 Kb), el XPS Peak. Éste nos permite deconvolucionar picos de espectros de XPS aplicando lineas de base (en la opción "Background" encontrarán los tipos lineal, tipo Shirley o Taugaard), agregando los picos de bibliografía ("Add peak") correspondientes a energías de unión de especies atómicas que especulamos que están presentes en el material, y optimizando el modelado ("Optimise all"). La optimización se puede repetir presionando varias veces "Optimise all" hasta que los valores del estadístico χ^2 deje de disminuir, en ese momento se logra el mejor fiteo de los picos. Al finalizar el ajuste de los picos, se exportan los datos de los picos (Data → Export Peak Parameters) en un archivo .par que se abre con un block de notas donde podemos ver los máximos corregidos de los picos ingresados junto a su área y su ancho a media altura (FWHM), con los que podemos calcular la proporción de cada especie atómica y tipos de uniones químicas entre elementos en la superficie del material.



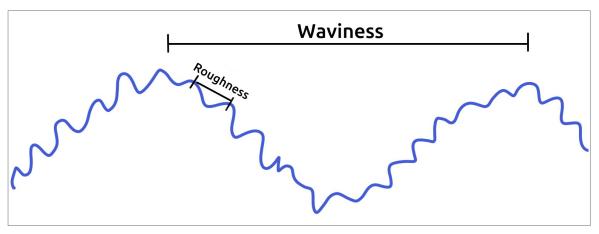
Ajuste de 6 picos en espectro XPS obtenido con un sólo click en "Optimise All" en XPS Peak.

Lamentablemente, el XPS Peak no está disponible para linux, pero es totalmente compatible con Wine, de hecho, yo lo uso bajo Wine y, de hecho, las figuras ilustrativas que muestro arriba son capturas de pantalla de mi PC con linux.

-Análisis de imágenes de microscopia de fuerza atómica (AFM)

Al igual que otros programas científicos, los microscopios de fuerza atómica (AFM) vienen con su propio software. Sin embargo, miembros del Departamento de Nanometrología del Instituto Checo de Metrología desarrollaron un software libre bajo la

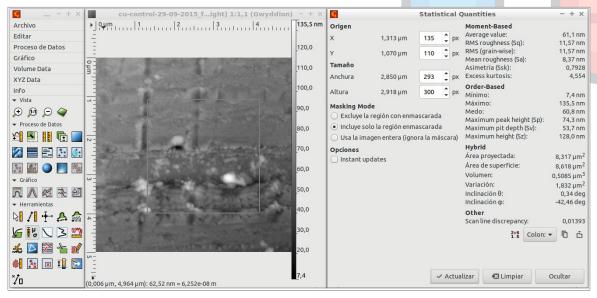
licencia GNU General Public License para el análisis de imágenes de microscopía AFM y SPM (Scanning Probe Microscopy), denominado Gwyddion. Es multiplataforma y liviano (24Mb el archivo .exe). Yo llegué a conocer éste programa en mi doctorado, donde analizaba biomateriales con modificaciones superficiales mediante distintas técnicas, entre las cuales estaba la microscopía AFM. Usábamos un microscopio que venía con un software empresarial completísimo, aunque muy pesado y con clave de seguridad. La mayoría de mis análisis lo realicé con ése software hasta que tuve que extraer parámetros de waviness (ondulación) de mis imágenes. Para simplificar, los parámetros de ondulación corresponden al espaciado medio entre los picos más distanciados de la superficie del material, siendo mayor que la longitud de los picos que definen la rugosidad (Ra, Rq, Rmax).



Relación entre parámetros de ondulación (waviness) y de rugosidad (roughness) de una superficie.

Con Gwyddion obtenés información de parámetros de rugosidad, análisis de perfil, waviness, etc. Además podés corregir las imágenes antes de analizarla aplicando filtros, generar vistas tridimensionales para publicar, extraer parámetros de recuadros y de análisis de perfiles, y un montón de opciones más. Los archivos compatibles con éste programa

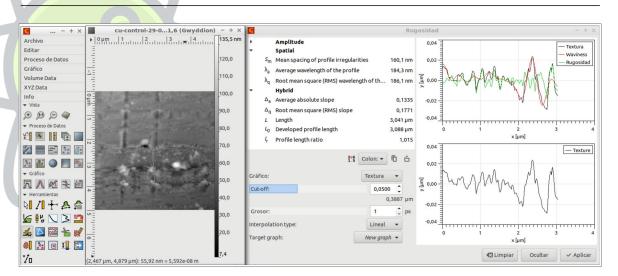
son los que exportamos como texto plano (*plain text*) desde el software del microscopio, aunque en su página web aseguran que soporta 130 formatos de archivo.



Análisis de sección de una imagen de AFM con Gwyddion (opción "Statistical Quantities"). Se observa la amplia variedad de parámetros reportados por el software.

Es impresionante la cantidad de datos interesantes que podemos extraer de una imagen de microscopía AFM y la rapidez con que podemos visualizarlos en Gwyddion. Además rescato su interfaz intuitiva y colorida. Y todo ésto con una liviandad increíble que nos permite ejecutar cualquier otro software en simultaneo, sin que se nos cuelque todo.

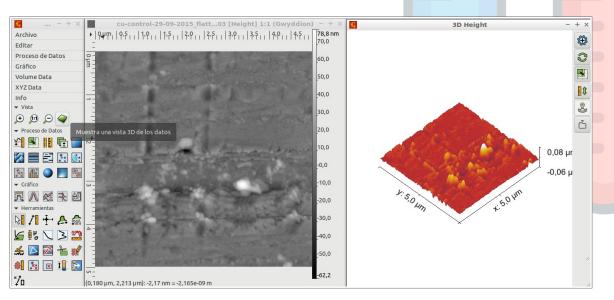
SOFTWARES GRATUITOS PARA CIENTÍFICAS Y CIENTÍFICOS



Análisis de perfil de una superficie metálica de cobre realizada en Gwyddion (opción "Calculate roughness parameters"). Se observa el reporte de parámetros "waviness" junto a los de rugosidad espacial.

Algo que nunca probé es analizar una figura de microscopía electrónica de barrido con éste programa. Se pueden abrir estas imágenes en formato .jpg en escala de grises. Cambiamos las dimensiones de la figura en *Change physical dimensions* valiendonos de la escala de la figura. Queda claro que los datos de rugosidad no son reales, pero podemos extraer perfiles de escala de grises obtenidas por SEM y medir distancias entre puntos que nos interesen.

MARCOS BERTUOLA



Generando una vista tridimensional de una superficie con Gwyddion para publicar en un póster o un paper.

-Análisis de espectros FTIR, ATR-FTIR, RMN, RAMAN y UV-Vis

Si quieren un programa que haga todo lo que promete el título, tienen que descargarse el KnowitAll®, la versión académica, que es gratuita si tenemos una cuenta de mail institucional. Sólo corre bajo Windows®, intenté con Wine en Linux pero no hubo caso. Yo lo comencé a utilizar en 2016 para analizar los espectros de infrarrojo (FTIR y ATR-FTIR) de polímeros y compuestos orgánicos en mi tesis de doctorado. En esos años el software era propiedad de BioRad®, aunque en 2019 pasó a manos de John Wiley & Sons Inc. y estuvo un breve tiempo desaparecido. Este año lo encontré y volví a testear las utilidades que venía usando. Todo funciona tal cual lo conocía, por eso se los traigo en esta sección. Se lo pueden descargar desde su página web, ingresando sus datos académicos reciben a su mail el link de descarga junto a la clave de registro. La clave se re-licencia (gratuitamente, no se preocupen) después de un año de instalación, te avisan por mail. Pasemos al programa. Se trata de una suite de análisis de espectroscopias (infrarrojo, resonancia magnética nuclear, raman, espectroscopía de masas y UV-visible). Particularmente, yo utilicé la opción *AnalyzeIt* dentro de *Spectral Analysis*, donde

podemos preprocesar los espectros extrayéndoles la linea de base (o *perform a baseline*), y/o seleccionando las unidades de los ejes (% de transmitancia o % de absorbancia). Los gráficos que se obtienen pueden exportarse en formato de texto, .csv o imagen para utilizarlos en publicaciones en revistas o congresos. Lo más característico es la incorporación de una base de datos ("The Sadtler handbook of infrared spectra" ¹) que nos da la posibilidad de identificar señales correspondientes a distintos grupos funcionales presentes en nuestro espectro de infrarrojo.



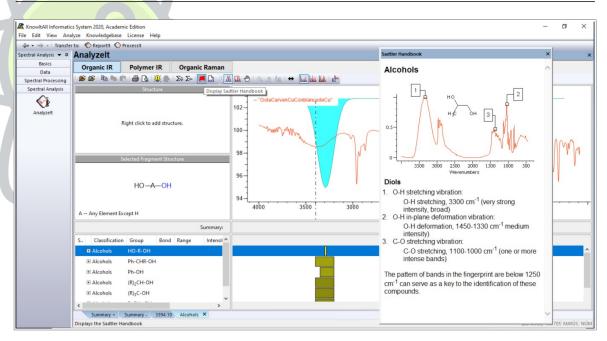
Espectro de FTIR importado en Knowitall® donde podemos ver un pico seleccionado con doble click (2960,2 cm⁻¹), los grupos funcionales que sugiere la base de datos incorporada (recuadro "Summary", abajo a la izquierda) y la estructura de la molécula que usa como referencia.

El proceso de asignación de bandas o picos a distintos grupos funcionales o uniones moleculares es sencillo, simplemente debemos importar el espectro FTIR, NIR o ATR-

¹ Sadtler Research Laboratories, Simons WW. The Sadtler Handbook of Infrared Spectra. (Simons WW, Son H and, eds.). W.W. Simons, Heyden and Son; 1978.

FTIR y seleccionar con doble click el pico de interés. Así se dibujará un pico tentativo en color celeste en el espectro y se abrirá una ventana abajo a la izquierda, en la cual se podrá seleccionar los grupos funcionales que presumimos que están presentes en nuestra molécula o polímero junto a sus energías correspondientes. Estos datos los tenemos que contrastar con más bibliografía de moléculas similares si no se encuentra el compuesto que estamos analizando en la lista que sugiere la base de datos del programa -lo cual es muy probable que no lo encontremos-. Éste proceso nos ahorra muchísimo trabajo, principalmente si no tenemos mucha idea de las energías vibracionales de los compuestos y grupos funcionales. Otra función interesante es el buscador de grupos funcionales que se ofrece gracias a su base de datos integrada. Presionando el ícono del librito rojo, se abrirá un buscador donde podemos seleccionar los grupos funcionales o uniones moleculares que suponemos que estarán presentes en nuestro espectro. Al abrir una de esas opciones, se marcarán todos los picos asociados a dicho grupo funcional junto a un listado de energías vibracionales y a que interacción corresponden.

SOFTWARES GRATUITOS PARA CIENTÍFICAS Y CIENTÍFICOS



Búsqueda por grupos funcionales dentro de la base de datos del Knowitall® para un espectro de FTIR. Se observa, superpuesto en el espectro de análisis, el pico resaltado en celeste correspondiente al stretching del oxhidrilo de un diol.

El software ofrece muchas otras opciones que no llegué a echar mano, como análisis de espectros RMN y Raman, dibujos de estructuras químicas, etc. Para mayor información pueden acceder a los tutoriales oficiales de <u>Knowitall® en youtube</u>. Para los usuarios de Linux lamentablemente no tenemos una opción tan completa como éste software, es una pena realmente.

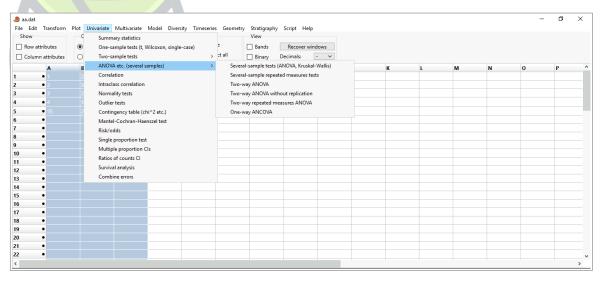
Análisis estadístico con PAST 4

Como ya sabrán, todo personal científico necesita analizar sus datos en forma estadística para poder informar un resultado. Existen varios programas para ésto y hasta algunos son gratuitos como el <u>GNU PSPP</u> con interfaz gráfica o el <u>R Studio®</u> con línea de comandos.

Sin embargo, para mis resultados necesito un programa simple que me permita volcar mis datos en una tabla simple, que no tengan las columnas y las filas catalogadas como muestra 1, 2,..., condición 1, 2,, respectivamente. Yo venía usando el Graphpad Prism® (pago bajo licencia) en el laboratorio donde realizaba mi doctorado, y al igual que con otros programas, al cambiar de laboratorio y de computadora, no pude activarlo en mi PC actual. Buscando y buscando encontré el PAST (PAleontological STatistics) desarrollado en el Museo de Historia Natural de la Universidad de Oslo por el equipo de Øyvind Hammer ². No nos dejemos engañar por el nombre, sirve para analizar cualquier tipo de datos, no sólo para la paleontología. Pesa 29Mb, es un ejecutable que no necesita instalación (es portátil) y está disponible para plataformas Windows® y MacOS®. Y acá abro un paréntesis. En sistemas operativos Linux, las versiones de PAST hasta la 2.17c corren bajo Wine, aunque con una interfaz gráfica y funciones que se distancian demasiado de las presentes en las versiones 4 en adelante. Ahora bien, como yo ya conocía este programa en su versión 4.03 corriendo en Windows®, me propuse encontrar una alternativa para hacer funcionar versiones actuales en navegadores web y que no dependan de si tengo o no Linux. Así fue como encontré un servicio de virtualización de aplicaciones de Microsoft®, llamado <u>Cameyo®</u>, que permite ejecutar softwares (portables, formato .exe) de hasta 50Mb directamente en un browser como Google Chrome™. La opción gratuita de Cameyo®, accesible mediante una cuenta de Microsoft® también gratuita, nos permite subir a nuestra sesión el archivo PAST.exe desde la PC en menos de 2 minutos y al clickear en *Play* el programa corre dentro del navegador web por unos 30 minutos. Los programas cargados en nuestra cuenta gratuita se eliminan luego de los 7 días de subidos, pero eso no importa, porque los podemos volver a subir sin problemas y usarlos nuevamente. El uso de PAST dentro de éste virtualizador no consume recursos de

² Øyvind H, Harper DAT, Ryan PD. PAST: Paleontological Statistics Software Package for education and data analysis. Palaeontol Electron. 2001;4(1):1-9.

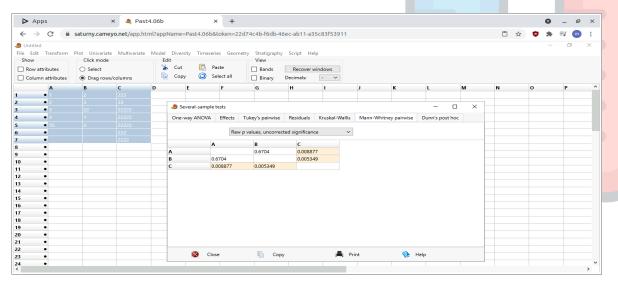
tu PC, funciona rápido pero no interactuá con el explorador de archivos de tu computadora, por lo que los datos que queramos ingresar los copiamos y los pegamos en la tabla, y a la inversa para los estadísticos calculados. Y cierro paréntesis.



Interfaz de PAST donde podemos apreciar algunos estadísticos relacionados al análisis de varianza ANOVA. Verán que tiene muchísimas opciones más dentro de análisis univariado y multivariado.

Ahora, si nos enfocamos directamente en el PAST, podemos decir que es un software estadístico completísimo con funcionalidades como análisis de componentes principales, de varianzas de uno y dos componentes, test de Student, test de linealidad y normalidad de los datos, test de Tukey, de Mann-Whitney, de Dunn, tablas de contingencia de Chi^{^2}, comparaciones múltiples entre tratamientos, correcciones por Bonferroni, etc. Todas sus herramientas se pueden consultar en el <u>manual de PAST oficial</u>, donde se especifican las ecuaciones y supuestos de cada test estadístico.

MARCOS BERTUOLA



Resultados estadísticos de un test de comparaciones múltiples (Mann Whitney) realizado en PAST a tres muestras independientes. Se observan, en la tabla de salida, los valores p menores a 0,001 resaltados en rosa indicando que la muestra C difiere significativamente de A (**) y de B (**), mientras que la A y la B no difieren entre sí.

Con respecto al formato de salida de los resultados, los test que indican si hay o no diferencias significativas entre tratamientos (columnas de datos) muestran una tabla directamente con las probabilidades resaltadas en rosa indicando una significancia con un $p \le 0.05$ (*). De allí también podemos decir que si un valor p es menor o igual a 0,01 le agregamos doble asterisco **, y si es menor o igual a 0,001 le agregaremos tres asteriscos ***.

Como plus, el PAST tiene un módulo excelente de ploteo de gráficos con opciones como boxplot, histogramas, gráficos polares, gráficos tridimensionales, de matrices, etc. La calidad de éstos gráficos es espectacular para las publicaciones.

SOFTWARES GRATUITOS PARA CIENTÍFICAS Y CIENTÍFICOS

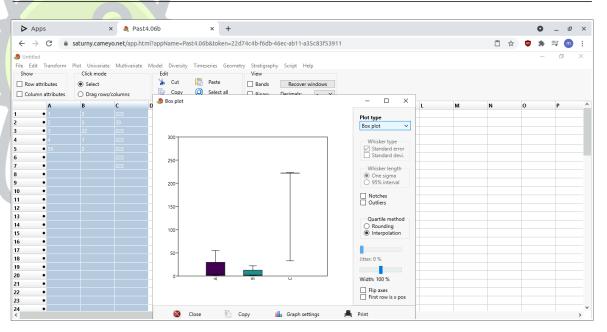
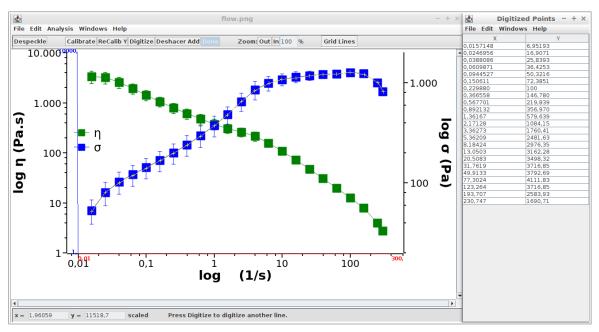


Gráfico boxplot realizado con el software PAST y algunas opciones para modificar. Se pueden encontrar más detalles presionando en "Graph settings".

Digitalización de gráficos escaneados o en formato de imagen

A veces, muy pocas veces, nos pasa que queremos conocer los datos reales de un gráfico de un paper o congreso del que sólo contamos con una foto o un archivo PDF. Para eso existen herramientas que permiten transformar la imagen de un gráfico en una tabla de datos listos para trabajarlos comparándolos con nuestros datos obtenidos, para modelarlos con alguna función, o simplemente para tener una referencia con que discutir experimentos con tu director o directora. Una muy buena opción para ésta tarea es el PlotDigitizer. Es gratuito, corre bajo java en MacOS®, Windows® y Linux, pesa aproximadamente 1,2 Mb y es portable, o sea que no hay que instalarlo. En el caso particular de Linux, el archivo del programa es el PlotDigitizer.jar y se abre con click derecho y "abrir con" OpenJDK Java 11 Runtime. La herramienta es muy simple de utilizar, importás una imagen con el gráfico a digitalizar -en formato .png, .jpg y .gif-,

clickeas en el origen de coordenadas para setear si la escala es logarítmica o lineal y los mínimos de los ejes X e Y (te pide ingresar el valor de ambos puntos o sea, 0 y 0), luego clickeas en la zona del gráfico que correspondería al valor máximo de X y de Y (ingresamos los valores máximos de X e Y que figuran en el gráfico importado), y luego van dibujando la línea del gráfico del que uno quiere extraer sus datos agregando tantos puntos como uno quiera. Al finalizar presionamos en "Done" y se abre una ventana con una tabla de datos X e Y que podemos copiar y pegar en otro programa o guardarlo como .csv.



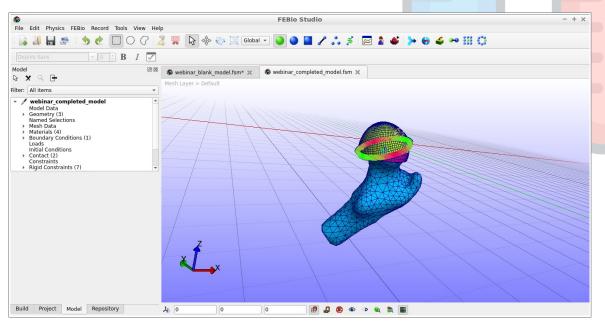
Digitalización de un gráfico en formato imagen (de mi autoría) con PlotDigitizer. La línea amarilla sobre la curva azul se crea en base a los puntos que voy marcando sobre la imagen. A la derecha se muestra la tabla de valores resultante.

También existe una app online llamada <u>WebPlotDigitizer</u> desarrollada en la Universidad de Notre Dame, que posee las mismas características que el PlotDigitizer pero que corre

en cualquier navegador web. Esta opción es más práctica para los que no usan la herramienta regularmente y tiene un manual de uso a disposición.

Análisis de elementos finitos

Actualmente en nuestro laboratorio estamos interesados en implementar simulaciones físicas de nuestros materiales en estado sólido y en fluidos con aplicaciones biomédicas. Éste tipo de análisis en tres dimensiones se denominan análisis de elementos finitos. Todavía no tuvimos la práctica suficiente con ésta metodología, sin embargo descubrimos un software que cubre nuestras necesidades: FEBioStudio. Deben crearse una cuenta gratuita y se lo pueden descargar e instalar en Windows®, MacOS® o Linux. Según los desarrolladores, integrantes del laboratorio de Jeff Weiss de la Universidad de Utah y del laboratorio de Gerard Ateshian de la Universidad de Columbia, no tiene requisitos mínimos de hardware para correrlo. Sin embargo, si tienen algún problema en iniciarlo, asegúrense de tener actualizado el OpenGL en su PC. Ésta herramienta nos permite resolver principalmente problemas no lineales de deformaciones en biomecánica, biofísica, mecánica de fluidos y de mezclas e interacciones fluido-sólido. Posee una interfaz gráfica donde podemos rotar, alinear, seleccionar zonas de interés, crear y modificar mallas, agregar materiales tridimensionales, etc. Es interesante que los materiales a modelar pueden ser customizados, seteando su densidad, módulo elástico fijo o variable en función de las zonas, modelo elástico o viscoelástico supuesto, etc. En su página web pueden encontrar tutoriales, webinars y manuales de uso en la solapa "Knowledgebase". Para comenzar a familiarizarse con el software recomiendo que vean el primer webinar con un tutorial paso a paso analizando una junta de cadera-femur. En este punto estamos en nuestro laboratorio, por eso no puedo adelantarles nada más. Lo que sí puedo decir es que FEBioStudio es muy prometedor, tiene diversos plugins y una comunidad creciente detrás.



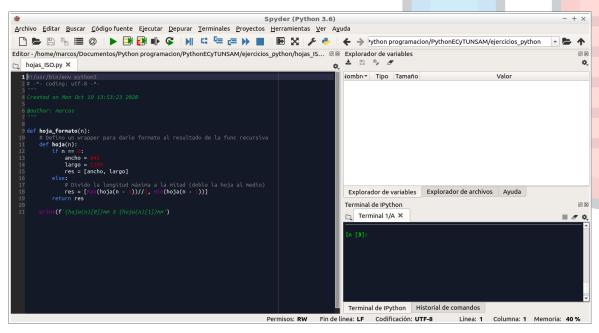
Representación tridimensional del análisis de elementos finitos de una junta acetábulo de caderafemur en FEBioStudio (modelo del <u>webinar introductorio</u> del software).

Herramientas de análisis, desarrollo y programación

Si todos los anteriores programas mencionados previamente en este libro no te son útiles, podes crear los tuyos con <u>Python</u>, <u>GNU Octave</u> o <u>Rstudio®</u>. En cuanto a programar en Python, en mi opinión, el mejor entorno de desarrollo integrado o IDE es <u>Spyder</u>, disponible para Windows®, MacOS® y Linux -dentro de la plataforma <u>Anaconda</u> para los primeros dos sistemas operativos-. Aunque si no necesitan una IDE pueden usar editores de texto multiplataforma como <u>Atom</u>, <u>Sublime Text</u>, y hasta <u>Visual Studio</u>. Como es un lenguaje de programación, Python nos permite hacer cálculos simples y complejos con nuestros datos, con una sintaxis bastante simple de entender y de aplicar. Se pueden automatizar procesos de análisis de datos, con aprendizaje automático o *machine learning*, analizar grandes volúmenes de datos o *big data*, plotear gráficos diversos y hasta analizar

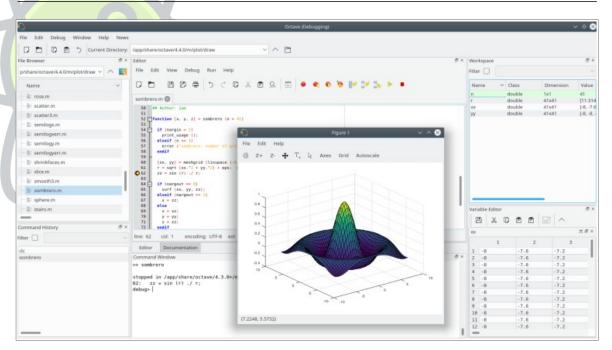
imágenes. Claro está que si no tenés conocimientos en programación (en cualquier lenguaje: Java, Ruby, C++, etc.) te va a resultar muy trabajoso, por eso recomiendo tomar video-tutoriales bien explicados en Youtube, como los del canal "Pildoras informaticas". En mi caso, en la universidad no tuve contacto con lenguajes de programación, lamentablemente, por ser una carrera de Ciencias Biológicas. Para compensar esa carencia, actualmente estoy tomando cursos de posgrado en la universidad donde trabajo con el fin de adentrarme en el mundo de la programación, más que nada para analizar mis datos y conocer el proceso de creación de software para aplicaciones científicas. Es todo un mundo, y me resulta abrumador cursar en esta etapa, pero creo que vale la pena. Me encantaría haber estudiado Ciencias de la Computación, o la recientemente creada en la UBA Licenciatura en Ciencia de Datos. En fin, Python tiene varios paquetes específicos para ploteo de gráficos (Pandas), cálculos numéricos (Numpy), aprendizaje automático para categorizar o clasificar datos (Scikitlearn) y análisis de redes neuronales (Keras), entre los más utilizados.

MARCOS BERTUOLA



Interfaz de Spyder utilizada para crear un mini programa en Python: una función que calcula el tamaño de una hoja de papel al ingresar su número ISO.

Si están acostumbrados a manejar Matlab® para análisis numérico computacional, una alternativa gratuita similar es GNU Octave. Comparte muchas características con Matlab®, como la sintaxis y las herramientas de análisis de datos disponibles, aunque es gratuito y más liviano (300Mb en Linux). La mayor desventaja del GNU Octave frente a Matlab® es la falta de una herramienta similar a *simulink*. Este programa no lo estuve utilizando pero se ve realmente muy potente para análisis y visualización de datos. Les dejo un <u>videotutorial</u> (de DrapsTV) que estoy viendo para sacarle el jugo a esta herramienta.



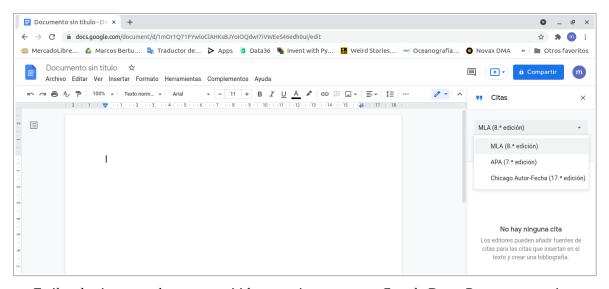
Interfaz de GNU Octave con un gráfico de ejemplo (imagen tomada de GNOME Software Center).

Si tu proyecto se centra más en análisis estadísticos, lo recomendable sería utilizar R Studio ya que posee una cantidad infinita de métodos estadísticos que podés *customizar* a pedido de tus datos. Ésta herramienta, a mi parecer, es más complicada de aprender que Python por su sintaxis, pero con algo de empeño, chequeando sus <u>tutoriales</u> y metiendo manos a tus datos experimentales podés analizarlos rápidamente. Consta con una comunidad amplia y mundialmente distribuida, y seguro que en tu instituto de investigación hay alguien que te puede dar una mano para iniciarte en programación en R.

Herramientas en navegadores

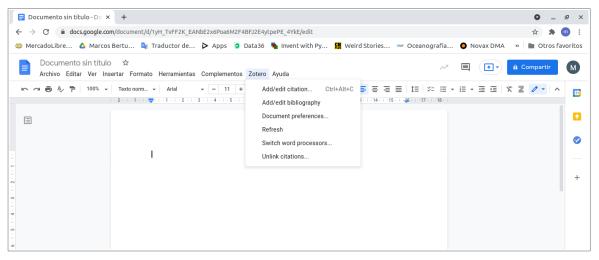
Hace algún tiempo resultaba imposible editar un documento de texto simultáneamente con tus coautores del trabajo, o con tu director o directora. Con la aceptación masiva de Google Docs, Google Sheet y Google Presentations comenzamos a trabajar

colaborativamente online, sin necesidad de guardar cambios, resaltar, enviar los archivos por mail, etc. Muchísima gente lo usa actualmente, y yo incluido, para redactar papers, posters, presentaciones para congresos, proyectos de investigación grupales, entre otros usos, por lo que no quisiera ahondar mucho en el tema. Lo que sí me gustaría resaltar son un par de funciones copadas que nos dan estas tres herramientas, como la posibilidad de trabajar sin conexión, cosa que si se nos corta internet podamos seguir modificando los archivos, guardándose en la PC, para después volver a actualizar el documento online una vez que se vuelva a conectar. Una nueva función que se agregó recientemente en 2021 es la herramienta de gestor de citas propio, ubicada no intuitivamente en la pestaña de herramientas → citas. Hasta ahora presenta sólo tres estilos de citas: APA (Asociación Americana de Psicología), MLA (Modern Language Association) y Chicago; esperemos que pronto agreguen otros más usados en revistas científicas.



Estilos de citas actualmente permitidos para insertar en tu Google Docs. Para agregar citas acceder a Herramientas \rightarrow Citas.

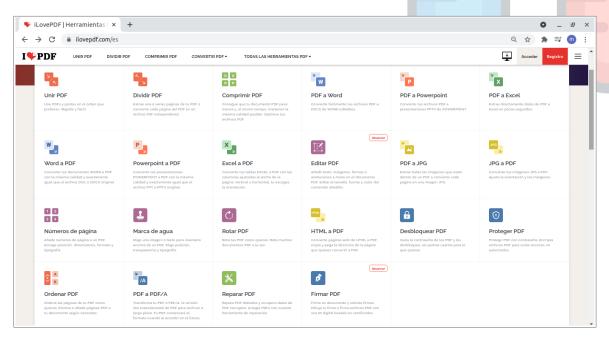
A su vez, Google Docs permite utilizar una extensión de navegadores llamada "Zotero Connector" que permite agregar citas incluidas en tu biblioteca personal del gestor de citas Zotero a Google Docs, de una manera similar al citado de bibliografía en documentos de texto de Word o Libreoffice. Para utilizarlo deberán añadir la extensión Zotero Connector a su navegador, y luego al abrir un documento de Google Docs les aparecerá una nueva pestaña llamada "Zotero" desde la cual podrán gestionar las referencias.



Plugin de Zotero (gestor de citas) dentro de Google Docs.

Dentro de las herramientas online que quiero destacar se encuentra la web www.ilovepdf.com, muy adorada por todos y todas porque nos facilita la tarea de reordenar archivos .pdf, convertir imágenes a .pdf, convertir .pdf no escaneados a documentos de texto editables, agregar marcas de agua, firmas y numeración a pdf, entre muchas otras. Todas éstas opciones son gratuitas, sólo las opciones de transformación de documentos escaneados a documentos editables son pagos. Es limitado también el número de archivos .pdf que podes unir de forma gratuita, pero para ésta dificultad les doy un truco: si tienen que unir más de 15 archivos .pdf, hagan la primera unión de 15 y luego van

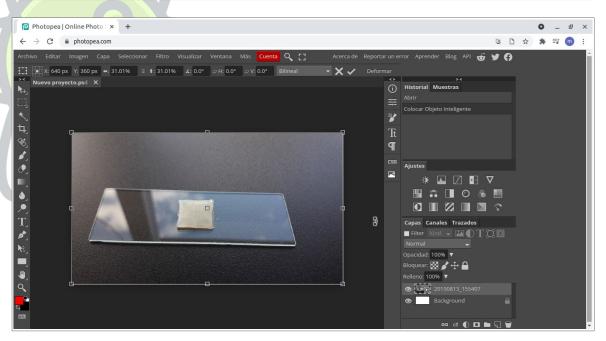
uniendo el resto de los archivos al anterior, ya que te lo considera como un sólo documento nuevamente.



Amplia variedad de funciones que ofrece la web www.ilovepdf.com.

Continuando con softwares que corren bajo un navegador, les comento que existe una opción para editar imágenes online al estilo de Photoshop® o GIMP, llamado <u>Photopea</u>. Fue diseñado por Ivan Kutskir en 2012, un programador ucraniano. Es una excelente y liviana herramienta para editar imágenes directamente, y abrir proyectos creados en otros programas como los formatos .PSD, .AI, .XD, .sketch, .XCF, entre otros. Ofrece además una amplia variedad de formatos para exportar las imágenes, transformando a éste software en una excelente alternativa para usuarios que no quieran instalar más software en su PC.

SOFTWARES GRATUITOS PARA CIENTÍFICAS Y CIENTÍFICOS



Interfaz de Photopea, herramienta de edición de imágenes online.

El último instrumento online que les recomiendo que utilicen es la página web alternativeto.net con la cual podrán encontrar alternativas gratuitas a sus programas habituales. En ésta web yo fui encontrando la mayoría de los softwares enumerados en éste libro. Al realizar la búsqueda, aparecen opciones tanto pagas (figuran como "commercial") como gratuitas (que figuran como "free"), junto a las plataformas donde funcionan (sistemas operativos u online).

Epílogo

Habiendo listado varios programas muy útiles, debemos pensar en realizar una donación, en cuanto se pueda, a aquellos equipos que las desarrollan para que tengan una retribución por todo el trabajo que hicieron y el mantenimiento que brindan. Personalmente creo que debemos ayudarnos mutuamente para el bien de la ciencia.

Sobre el autor

Dr. en Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata y licenciado en Ciencias Biológicas de la Universidad de Buenos Aires. Actualmente soy becario postdoctoral de CONICET con lugar de trabajo en el Laboratorio de Biomateriales, Biomecánica y Bioinstrumentación (Lab3Bio) dentro del Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas de la Universidad Nacional de San Martín, Buenos Aires, Argentina.

Agradecimientos

Agradezco a todos/as los/as desarrolladores/as de aplicaciones y software científico de calidad que lo distribuyen de manera gratuita. Es una ayuda enorme para científicos y científicas en países de bajos recursos.